



TITLE:

馬蹄系力学を越えて(モレキュール
「多自由度の力学系と幾何学」,研
究会報告)

AUTHOR(S):

戸田, 幹人

CITATION:

戸田, 幹人. 馬蹄系力学を越えて(モレキュール「多自由度の力学系と幾何学」,研究会報告). 物性研究 1995, 64(4): 409-411

ISSUE DATE:

1995-07-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/95560>

RIGHT:

馬蹄系力学を越えて

京大理学部物理 戸田幹人

0. はじめに

まず、表題の意図する所を説明しよう。一次元写像におけるカオスの基本的なメカニズムは、馬蹄系力学で理解できる。引き延ばし・折り畳みの繰り返しによって複雑な軌道が生成されていく様子は、すでに馴染み深いものである。これに対して、多自由度系のカオスでは、より多様なメカニズムが可能にならないだろうか。このような研究が何故必要かという点に関して、以下に2つの立場から考えよう。

1. 反応過程論の中で

化学反応やクラスターなど少数多体系のダイナミックスで重要なのは、位相空間のボトルネック（力学系の立場で考えた時の遷移状態 [1]）や、位相空間のつながり方が変わる場所を知ることである。すなわち、ボトルネックの場所と、それらが相互にどうつながっているかが興味の対象なのだ。

この時、長時間平均として計算されるリャプノフ指数は、あまり役に立つ情報を与えてくれない。ここではむしろ、より短い時間スケールで運動を特徴付ける方法が必要なのである。その一つとして提案されているのは、リャプノフ指数の揺らぎであるが [2]、しかし、これには位相空間のつながり方に関する情報が入っていない。

n 自由度からなる力学系で、遷移状態は、 $n-1$ 自由度からなる不安定な不変多様体である [3, 4]。これは、2 自由度において、不安定な周期軌道を遷移状態とする考えの拡張になっている。また、それら遷移状態の相互のつながり方は、その安定・不安定多様体のホモクリニックまたはヘテロクリニックな交差の様子で与えられる。この時、位相空間のつながり方の変化は、安定・不安定多様体が接する時に起こる。これは、Grebogi・Ott らによって見いだされた crisis という現象に他ならない [5]。しかし、彼らが考えたのが外部パラメータの変化に対する crisis であるのに対して、ここで問題にしているのは、系を構成している自由度のダイナミックスによって引き起こされる crisis なのである。この場合には一般に、crisis の前後でカオスに参加する自由度の数が変化する [6]。

このカオスの次元の変化を、どのようにして短時間のダイナミックスから検出するかという問題が起こる。そのために、次元が増えた時に始めて可能となるカオスのメカニズムがあるのか、という問いが必要になる。そのメカニズムを、馬蹄系力学がそうであったように、モデルとして取り出しておければ、crisis の前後でどのようにカオスの次元が変化したかを調べることができよう。

以上のような動機による計算を、3 自由度系のファンデルワールス系を対象に行なっている [6]。この場合、解離極限が、上記で述べた不変多様体になっている。また、ゼロエネルギーでの衝突・解離軌道の全体が、

その不安定・安定多様体である。ポアンカレ写像は4次元であるから、直接的な視覚化はできない。従って、不安定多様体がどのように折り曲げられるかを、4次元ポアンカレ面から2次元空間へ射影を行ない、その射影の特異点（ラグランジアン特異点[7]）を見ることで視覚化する。この時、カオスの次元は、不安定多様体が二つ折りされるか、四つ折りされるかの違いとして現れることが、すぐに推測できる。この違いは、射影した時の特異点の違いとして識別できる。

カオスの次元が変化する場所としての crisis は、反応論の文脈でいえば、反応経路が分岐する場所、あるいは、系の内部でのエネルギーの流れ（Intramolecular vibrational-energy Redistribution）が変わる場所としての意味を持つ。従って、たとえば分子の配置にかかわる自由度において、配置の変化が起こるか起こらないかの分岐場所になっているなど、crisis は、反応過程において重要な役割を果たしていると予想している。

2. 不可逆性の起源論の中で

従来、不可逆性の起源は、自由度が極めて大きいことに基付くと考えられてきた。しかし、少数自由度の力学系が、カオスと呼ばれる確率的な挙動を示すことが明らかになって以来、本質的に重要なのは、自由度の数そのものではなく、むしろ挙動の複雑さなのだということが、受け入れられるようになった。従って、ここであらためて、大自由度ということが何を意味するのか考える必要があるだろう。

多自由度系のカオスでは、より多様なメカニズムが可能にならないか、という問いは、多自由度の力学系ではじめて可能となる「複雑さ」は何かと問うことを意味する。これは、不可逆性の起源という文脈で考えると、「散逸」という形でひとくくりに扱われてきた現象に、実は「複雑さ」の程度に応じた階層性があるのではないか、という問題でもある。

上述したような「複雑さ」は、量子系ではどのような役割を果たし得るだろうか。量子系では従来、不可逆性はランダム位相と関係付けられる。しかし、波動関数の位相の値そのものには物理的な意味は無い。不可逆性は、波動関数の位相欠陥の挙動と関係するはずだ。

ここで、位相欠陥という時に考えているものを特定しておこう。一般に、位相欠陥は波動関数のゼロ点である。超流動などにおける渦がそれにあたる。しかし、位相欠陥という考えはより広い文脈で見られる[8、9]。たとえば、相空間表示のように波動関数が解析的な表現をもつとき、その表示でのゼロ点は位相欠陥になっている。この位相欠陥の運動は、半古典論が成立する範囲では、ラグランジアン多様体がどのように折り畳まれるかを反映している。すなわち、対応する古典論がカオスであるかどうか位相欠陥の運動の違いをもたらす。従って、多自由度系のカオスでは、より多様なメカニズムが可能にならないか、という問いは、位相欠陥の挙動が多自由度系でどうなるかという問題に対して手がかりを与えるだろう。

さらに、位相欠陥の挙動の研究を通じて、量子古典対応という発想を離れた「量子カオス」の研究が可能になるかも知れない。すでに、相互作用する多体系のモデルで「量子カオス」の研究が始まりつつあるが、まだ、スペクトル統計の特徴付けにとどまっている[10]。これに対して、波動関数の特徴付けという点で、位

相欠陥の研究が有効なのではないかと予想している。

3. 展望

crisis を通じて、カオスに関与する自由度の数がダイナミックに変動することは、環境と系の間の情報のやり取りのモデルとなり得る。一般に、或る大きな全系を、「系」と「環境」に分けることを考えよう。実際には、空間的な配置のされかたも重要であるはずだが、ここでは運動の時間スケールのみに着目して、特徴的な時間スケールに大きな差があれば、そこに「境界」があると考えことにしよう。従って、近接した時間スケールをもつ一群の自由度があれば、それを「系」と考える。この「系」に対して、より早い時間スケールを持つ「内部環境」、より遅い時間スケールを持つ「外部環境」が想定できる。問題になるのは、これらの「境界」である。カオスや intermittency の場合には、特徴的な時間といっても、位相空間のどこにいるかによって実効的な時間スケールは異なってくるだろう。

上述した crisis の場合では、位相空間の或る領域で断熱的な自由度が、別の領域ではカオスに参加するということが起こっている。しかも、これらの領域の間を行き来する運動が起こる。従って、crisis を、環境と系の境界がダイナミックに変動するメカニズムとして特徴付けることができよう。その意味で、生体系を含む大きな分子系における系と環境の間での、情報の取り込み・吐き出しの役割を果たしているのではないか。

参考文献

- [1] M.J.Davis and S.K.Gray, J.Chem.Phys.84, 5389 (1986).
- [2] C.Amitrano and R.S.Berry, Phys.Rev.Lett. 68,729, (1992).
C.Amitrano and R.S.Berry, Phys.Rev. E47, 3158, (1993).
- [3] R.E.Gillian and G.S.Esra, J.Chem.Phys.94, 2648 (1991).
- [4] S.Wiggins, *Normally Hyperbolic Invariant Manifolds in Dynamical Systems*(Springer,1994).
- [5] Y.C.Lai, C.Grebogi, R.Blümel and I.Kan, Phys.Rev.Lett.71, 2212 (1993).
- [6] M.Toda Phys.Rev.Lett.74, 2670 (1995).
- [7] V.I.Arnold,*Singularity Theory* (Cambridge, 1981).
- [8] P.Leboeuf and A.Voros, J.Phys. A23, 1705, (1990).
- [9] M.Toda, Physica D59, 121, (1992).
- [10] G.Montambaux, D.Poilblanc, J.Bellissard and C.Sire, Phys.Rev.Lett.70, 497 (1993)
D.Poilblanc, T.Ziman, J.Bellissard, F.Mila and G.Montambaux, Europhys.Lett. 22, 537 (1993).